

## *Projet NUMATH*

*Analyse Mathématique & Traitement Numérique de Modèles  
Non linéaires*

*Nancy*

THÈME 4B



*R*apport  
*d'Activité*

2000



## Table des matières

<b>1</b>	<b>Composition de l'équipe</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Présentation et objectifs généraux</b>	<b>4</b>
<b>3</b>	<b>Fondements scientifiques</b>	<b>5</b>
3.1	Méthodes de perturbations et multi-échelles . . . . .	5
3.2	Optimisation de formes . . . . .	6
3.3	Contrôle et Stabilisation . . . . .	7
<b>4</b>	<b>Domaines d'applications</b>	<b>8</b>
4.1	Panorama . . . . .	8
4.2	Problèmes Non Linéaires en électromagnétisme . . . . .	8
4.2.1	Applications aux métaux liquides . . . . .	8
4.2.2	Applications aux plasmas . . . . .	9
4.3	Prédicibilité et simulation numérique pour les modèles océaniques . . . . .	9
4.4	Chimie moléculaire . . . . .	10
<b>5</b>	<b>Logiciels</b>	<b>10</b>
5.1	Bibliothèque Para++ . . . . .	10
5.2	SLV . . . . .	11
<b>6</b>	<b>Résultats nouveaux</b>	<b>11</b>
6.1	Problèmes Non Linéaires en électromagnétisme . . . . .	11
6.1.1	Analyse mathématique et méthode numérique pour l'équation de Vlasov	11
6.2	Contrôle et identification de formes . . . . .	13
6.2.1	Aspects théoriques généraux. . . . .	13
6.2.2	Problèmes à frontière libre. . . . .	14
6.2.3	Identification d'inclusions et de fissures . . . . .	15
6.2.4	Calcul numérique de formes . . . . .	15
6.3	Stabilisation de structures flexibles . . . . .	16
6.3.1	Stabilisation d'un système hybride . . . . .	16
6.3.2	Analyse spectrale . . . . .	16
6.3.3	Contrôlabilité exacte et applications . . . . .	16
6.3.4	Analyse et contrôle des interactions fluide-structure . . . . .	17
6.4	Prédicibilité et simulation . . . . .	17
6.4.1	Nombre fini de degrés de liberté déterminants pour un modèle quasigéostrophique multicouches de l'océan. . . . .	18
6.4.2	Autour du modèle barotrope de l'océan. . . . .	18
6.4.3	Sensibilité de l'attracteur de Lorenz. Une approche par les orbites périodiques instables . . . . .	19
6.4.4	Schémas compacts pour les modèles océaniques . . . . .	19
6.5	Chimie moléculaire. . . . .	19
6.5.1	Potentiel électrostatique . . . . .	20

6.5.2	Dynamique moléculaire . . . . .	20
6.5.3	Couplage de méthodes . . . . .	21
6.5.4	Méthode rapide pour l'optimisation de géométrie moléculaire . . . . .	21
<b>7</b>	<b>Contrats industriels (nationaux, européens et internationaux)</b>	<b>21</b>
7.1	CEA . . . . .	21
<b>8</b>	<b>Actions régionales, nationales et internationales</b>	<b>22</b>
8.1	Actions régionales . . . . .	22
8.1.1	Centre Charles Hermite . . . . .	22
8.1.2	Autres . . . . .	22
8.2	Actions nationales . . . . .	22
8.2.1	Action de Recherche Coopérative COUPLAGE . . . . .	22
8.2.2	Participations à des GDR . . . . .	22
8.2.3	Responsabilités nationales et locales assurées par les membres du projet : . . . . .	22
8.3	Actions européennes . . . . .	23
8.3.1	Projets PROCOPE . . . . .	23
8.3.2	Projet Polonium . . . . .	23
8.4	Relations internationales . . . . .	23
8.4.1	Lawrence Berkeley National Laboratory . . . . .	23
8.4.2	Projets Lyapounov . . . . .	23
8.5	Visites et invitations de chercheurs . . . . .	23
<b>9</b>	<b>Diffusion de résultats</b>	<b>24</b>
9.1	Animation de la Communauté scientifique . . . . .	24
9.2	Participation à des colloques, séminaires, invitations . . . . .	24
9.2.1	Congrès internationaux . . . . .	24
9.2.2	Colloques et workshops . . . . .	24
9.2.3	Invitation à des séminaires et cours . . . . .	24
9.3	Enseignement . . . . .	25
<b>10</b>	<b>Bibliographie</b>	<b>25</b>

---

*Numath est un projet commun à l'INRIA, au CNRS et à l'université Henri Poincaré, via l'Institut Elie Cartan de Nancy<sup>1</sup> (UMR 7502 CNRS-INRIA-UHP).*

## 1 Composition de l'équipe

### Responsable scientifique

Olivier Coulaud [Directeur de Recherche Inria, depuis octobre]

### Responsable permanent

Francis Conrad [Professeur (UHP)<sup>2</sup>]

### Assistante de projet

Bénédicte Lemaire [CDD INRIA (de Février à août)]

Sabrina Vardenal [CDD INRIA (à partir d'octobre)]

### Personnel INRIA

Evgueni Kazantsev [Chargé de Recherche]

### Personnel CNRS

Eric Sonnendrücker [Chargé de Recherche(jusqu'en août)]

### Personnel UHP

Christine Kazantsev [Maître de Conférences]

Bruno Pinçon [Maître de Conférences ESIAL<sup>3</sup>]

Jean-Rodolphe Roche [Maître de Conférences]

Jan Sokolowski [Professeur]

Marius Tucsnak [Professeur]

---

1. IECN

2. Université Henri Poincaré

3. Ecole Supérieure d'Informatique et Applications de Lorraine

**Ingénieurs experts**

Stéphane Rochaud

**Chercheurs post-doctorants**

Károly Németh [Post-doc UHP via le CCH]

**Chercheurs doctorants**

Antoine Chapelon [Allocataire, moniteur UHP]

Francis Filbet [Allocataire INRIA]

Gilles Frémiot [Allocataire, moniteur UHP]

Geoff O'Dowd [Professeur agrégé]

Fatima Zahra Saouri [ATER Nancy 2]

Laurence Viry [Ingénieur UHP]

**Collaborateurs extérieurs**

Pierre Bertrand [Professeur UHP-LPMI<sup>4</sup>]

Alain Ghizzo [Professeur UHP-LPMI]

Gérald Monard [Professeur UHP-LCTN<sup>5</sup>]

**Stagiaire**

Séraphin Dos Santos [CCH]

## 2 Présentation et objectifs généraux

Numath est un projet commun à l'INRIA, au CNRS et à l'Université Henri Poincaré, via l'Institut Elie Cartan de Nancy (UMR 7502 CNRS-INRIA-UHP).

L'activité du projet relève de l'utilisation des mathématiques pour la résolution de problèmes des sciences de l'ingénieur. Elle est plus particulièrement centrée (sans que ce soit limitatif) sur l'étude des équations aux dérivées partielles non linéaires sous les trois aspects : **analyse mathématique, traitement numérique, modélisation et applications.**

---

4. Laboratoire de Physique des Milieux Ionisés, Nancy

5. Laboratoire de Chimie Théorique de Nancy

Les recherches effectuées peuvent se situer à divers maillons, à savoir : la modélisation mathématique, l'étude théorique des modèles obtenus, la description d'une méthodologie de résolution, la conception d'algorithmes numériques adéquats et leur implantation effective. Les travaux sont menés avec le double souci de résoudre des problèmes précis, points de départ de la réflexion, et de dégager des méthodes ou de développer des outils à portée plus générale.

Les domaines d'applications peuvent donc être variés. Les questions mathématiques soulevées relèvent quant à elles, des équations ou systèmes d'équations aux dérivées partielles, de leur contrôle et, par extension, des problèmes d'optimisation sous-jacents, ainsi que de leur approximation et résolution.

Les centres d'intérêt plus spécifiques du projet peuvent être classés comme suit :

1. Contrôle et stabilisation : il s'agit de la stabilisation de systèmes vibrants modélisés par des EDP tels que les antennes de satellites, les parties flexibles de robots et d'installations industrielles.
2. Optimisation de formes et problèmes connexes : les applications sous-jacentes sont liées au domaine de la mécanique du solide (identification de fissures, ...).
3. Méthodes numériques et algorithmes parallèles.

Un effort tout particulier est fait pour participer aux activités de parallélisme du Centre Charles Hermite<sup>6</sup> (CCH). Ceci se concrétise par l'utilisation intensive du parallélisme sur les thèmes demandeurs de gros calculs (magnétohydrodynamique, turbulence dans les plasmas, optimisation de formes 3-d, modèles en océanographie et météorologie, chimie moléculaire, ...), par la responsabilité de quatre opérations du CCH et dans la participation à une autre opération (plasma).

## 3 Fondements scientifiques

### 3.1 Méthodes de perturbations et multi-échelles

**Mots clés :** couche limite, perturbation singulière.

**Participants :** Pierre Bertrand, Olivier Coulaud, Evgueni Kazantsev, Eric Sonnendrücker, Laurence Viry.

**Glossaire :**

**méthodes multi-échelles** méthodes faisant intervenir différentes échelles de temps ou d'espace.

**Résumé :** *Les applications traitées dans le projet (biologie, chimie, électromagnétisme, océanographie,...) font apparaître des phénomènes avec des échelles multiples en espace ou en temps. Nous analysons ces phénomènes, d'une part pour en déduire des modèles soit plus précis soit plus rapides, d'autre part pour construire des algorithmes plus efficaces.*

---

6. Centre lorrain de compétence en modélisation et calcul à hautes performances

Dans de nombreux problèmes traités dans le projet, les phénomènes en jeu apparaissent à différentes échelles d'espace et de temps. Ceci se traduit dans les équations par la présence de petits paramètres, qui induisent des couches limites, des zones de transitions. Dans ces régions, la solution présente des variations brutales, qui sont numériquement difficiles à traiter.

Deux approches peuvent être envisagées pour traiter ces problèmes. La première consiste à écrire un développement de la solution en fonction du paramètre étudié puis à construire formellement le système satisfait par le premier terme du développement. Une des difficultés est de montrer que le système limite ainsi construit est bien la limite du système initial lorsque le paramètre tend vers zéro. La connaissance du comportement de la solution dans les couches limites ou des zones de transitions permet de construire des méthodes de décomposition de domaines particulièrement rapides. La deuxième approche consiste à simuler les phénomènes de plus petites échelles du petit paramètre par une loi plus au moins empirique. Cette approche autorise des discrétisations moins fines et conduit à des temps d'exécution plus rapides.

### 3.2 Optimisation de formes

**Participants :** Gilles Frémiot, Jean Roche, Jan Sokolowski.

**Mots clés :** optimisation de forme, problème inverse, problème variationnel et à frontière libre, théorie du potentiel, dérivée topologique, équation intégrale, méthode de Newton.

**Glossaire :**

**optimisation de formes** optimisation du domaine géométrique pour un système décrit par des équations aux dérivées partielles

**Résumé :**

*Nous sommes intéressés par les problèmes d'optimisation de formes issus d'optimisation de structures en mécanique des solides et des problèmes à frontière libre. Nous étudions les conditions d'optimalité pour les problèmes définis sur des surfaces en dimension 3. D'autre part, on développe des méthodes de type Newton avec des convergences superlinéaires pour traiter les problèmes d'optimisation de formes en trois dimensions.*

L'optimisation de formes intervient dans des domaines variés tels que la conception, l'étude de nouveaux matériaux, l'optimisation de pièces sous contraintes (ailes d'avions, moules, ...). Il s'agit de minimiser une fonction coût dépendant de la géométrie du domaine, en général une énergie, sous certaines contraintes. On peut traiter par cette méthode de nombreux problèmes à frontière libre (lévitation haute fréquence, problème de contacts pour les coques, ...). Par rapport aux techniques d'optimisation classique, la difficulté réside dans le fait que la solution est un domaine géométrique (un segment, une surface, un volume). Nous devons adapter les méthodes usuelles (dérivation, point critique, ...) à ce nouveau cadre. Une des premières questions à traiter, après l'existence du point critique, pour les méthodes numériques est la caractérisation des conditions d'optimalité du 1<sup>er</sup> ordre (équation d'Euler généralisée ou inégalité variationnelle) et du 2<sup>e</sup> ordre. La condition du 1<sup>er</sup> ordre donne l'équation satisfaite par la solution. La condition du 2<sup>e</sup> ordre intervient lorsque l'on s'intéresse aux questions de stabilité de la forme, et dans la construction de méthodes numériques de type Newton.

D'un point de vue numérique, l'objectif est de développer des méthodes numériques d'optimisation de formes adaptées pour traiter les problèmes en dimension 3. Pour cela, nous nous intéressons aux méthodes de type Quasi-Newton et Newton qui conduisent à des techniques d'optimisation de formes avec des vitesses de convergence superlinéaire. Une des difficultés liées à la méthode de Newton réside dans la construction de la dérivée seconde de l'énergie. Pour résoudre la condition d'optimalité, nous utilisons les méthodes intégrales en posant le problème sur la surface.

Le savoir-faire acquis sur l'analyse mathématique et la simulation numérique de ces modèles nous conduit à élargir notre champ d'applications et à considérer des problèmes connexes nouveaux, à savoir :

- problèmes de contacts pour des coques, des plaques,
- problèmes en plasticité,
- identification de fissures ou inclusions dans un solide par des méthodes non destructives.

### 3.3 Contrôle et Stabilisation

**Mots clés :** contrôlabilité, stabilisation, commande frontière, commande distribuée, système hybride.

**Participants :** Francis Conrad, Geoff O'Dowd, Fatima Zahra Saouri, Marius Tucsnak.

**Résumé :** *Ces travaux relèvent du contrôle et de la stabilisation d'équations aux dérivées partielles d'évolution, au moyen de feedbacks linéaires ou non linéaires, distribués ou frontière. Les applications concernent le couplage fluide-structure et les systèmes élastiques vibrants tels que : structures spatiales flexibles, antennes, assemblage de systèmes mécaniques, matériaux intelligents, bras robots en torsion ou en flexion, pont roulant.*

Etant donné un système élastique vibrant, on cherche des contrôles par retour d'état qui stabilisent le système. C'est une problématique fortement liée à la contrôlabilité exacte. Les contrôles sont distribués ou appliqués sur le bord du domaine, ou sur un ensemble fin de l'intérieur. Ils peuvent faire intervenir des dérivées en temps d'ordre aussi élevé que dans le modèle, par exemple une corde ou une poutre avec masses en des points intérieurs ou frontières. On obtient alors des systèmes dits hybrides (couplage EDP-EDO), dont l'étude présente des difficultés spécifiques.

L'utilisation de multiplicateurs pour obtenir des estimations, le couplage avec la théorie des perturbations compactes de Gibson-Russell, permettent d'obtenir des résultats de stabilité forte ou uniforme, ou de non stabilité selon les commandes.

Une question intéressante concerne l'obtention plus explicite du taux de stabilisation, en fonction des lois de feedback. Les ingénieurs mesurent le degré de stabilisation d'un système amorti en calculant le spectre (approché) du système. Il est donc intéressant de savoir si ce spectre caractérise effectivement le taux de décroissance uniforme de l'énergie. Ce problème

est non trivial pour les systèmes de dimension infinie, même si le système est gouverné par une EDP dévolution en dimension un d'espace. Une analyse spectrale fine peut permettre de vérifier dans certains cas que les modes propres du système constituent une base de Riesz de l'espace d'énergie, et d'en déduire le taux optimal de décroissance de l'énergie.

Parmi les autres thèmes où il reste encore beaucoup de questions ouvertes, on peut citer : le lien entre les problèmes de contrôle en dimension infinie et ceux résultant de l'approximation de ces problèmes en dimension finie ; les applications de l'analyse de Fourier non harmonique au contrôle des structures ; les problèmes de contrôle actif grâce à des matériaux intelligents. Par exemple le couplage fluide-structures : il s'agit de l'étude du contrôle actif d'un écoulement fluide sur la structure environnante grâce à des "matériaux intelligents". Ce problème concerne, entre autres, des secteurs comme l'étude des grandes structures spatiales ou la réduction du bruit dans les avions.

## 4 Domaines d'applications

### 4.1 Panorama

**Mots clés** : environnement, santé, électromagnétisme, plasma, mécanique des solides, chimie moléculaire, météorologie.

Nous nous intéressons aux questions mathématiques liées aux propriétés des équations (existence, unicité, régularité, comportement asymptotique, ...), à leur discrétisation (résultats d'approximations, ...), aux algorithmes numériques pour les résoudre ainsi qu'à leur parallélisation. Nous étudions ces questions principalement dans trois domaines : l'électromagnétisme, la météorologie et la chimie moléculaire. La mécanique des solides est aussi abordée mais de manière moins forte.

### 4.2 Problèmes Non Linéaires en électromagnétisme

**Mots clés** : perturbation singulière, méthode multi-échelle, magnétohydrodynamique, plasma, fusion, décomposition de domaine, calcul parallèle, équation de Maxwell, équation de Vlasov.

**Résumé** : *Nous étudions deux domaines où le champ électromagnétique joue un rôle important. Le premier concerne le traitement des métaux liquides par champ magnétique (brassage, chauffage, guidage...). Le deuxième concerne le déplacement de particules chargées qui est un enjeu important pour la fusion thermonucléaire ou les tubes de faisceaux de particules.*

#### 4.2.1 Applications aux métaux liquides

L'une des motivations importantes concerne la modélisation des procédés de traitement électromagnétique des métaux liquides. Ceci recouvre de nombreuses applications ; certaines

bien établies dans les traitements industriels des métaux, d'autres en cours d'étude. La modélisation complète doit prendre en compte les phénomènes électromagnétiques, hydrodynamiques et thermiques, tout ceci avec plusieurs types de frontières libres : air/métal liquide ou liquide/solide pour la solidification. Le modèle s'écrit avec les équations de Maxwell, les équations de Navier-Stokes et des lois de comportement à préciser. Nous considérons le cas où les courants imposés sont de "hautes fréquences". Notre but consiste à justifier l'approximation dite de "hautes fréquences" dans laquelle le champ magnétique ne pénètre pas à l'intérieur du conducteur.

Lorsque les courants imposés sont de hautes fréquences, le problème à frontière libre se ramène à un problème d'optimisation de forme ; aussi les problèmes de lévitation magnétique servent de test aux algorithmes développés dans le cadre de l'optimisation de forme.

#### 4.2.2 Applications aux plasmas

L'étude de déplacements de particules chargées est un problème important dans l'obtention d'énergie de fusion. Ce problème fait partie des "grands challenges" numériques aux USA. Pour simuler le déplacement de particules chargées dans leurs champs auto-consistants, on résout numériquement les équations de Vlasov-Maxwell en remplaçant éventuellement les équations de Maxwell par un modèle approché comme Poisson. Vu les échelles de temps très différentes intervenant dans ces problèmes, il faut développer des modèles et des méthodes numériques adaptés.

### 4.3 Prédicibilité et simulation numérique pour les modèles océaniques

**Mots clés :** environnement, prédicibilité, attracteur, modèle quasi-géostrophique, géophysique, système parabolique non linéaire.

**Glossaire :**

**Prédicibilité** estimation du temps pendant lequel la prédiction est valable.

**Résumé :** *Les recherches concernent l'étude de la prédicibilité des circulations océaniques et atmosphériques et de leurs attracteurs.*

Le problème général de la prédicibilité consiste à estimer l'évolution de l'erreur due aux données et à prédire au bout de combien de temps cette erreur devient prédominante dans le calcul et interdit donc toute prévision. Cela conduit entre autres à l'étude théorique et numérique de l'attracteur du système. Plus précisément, on aborde les questions suivantes.

Tout d'abord, pour l'estimation numérique de la prédicibilité du modèle quasi-géostrophique barotrope de circulations océaniques pour un intervalle de temps fini, on utilise une caractéristique bien connue de la prédicibilité d'un système non linéaire que sont les exposants de Lyapunov, qui mesurent la croissance de la perturbation lorsque le temps tend vers l'infini. On étudie la généralisation des exposants de Lyapunov par les exposants locaux pour indiquer localement l'augmentation de l'erreur, pendant un intervalle de temps.

Le problème de prédicibilité est lié à celui de l'assimilation des données. Les circulations océaniques du mois dernier sont-elles nécessaires pour prévoir celles de demain ? De plus, à

partir de mesures des circulations sur la surface, données par les satellites, peut-on reconstruire les circulations de l'océan en entier? C'est le problème d'unicité de la solution du modèle quasi-géostrophique multicouche lorsque la solution de la couche supérieure est imposée.

Enfin, une difficulté fondamentale dans la modélisation des systèmes turbulents, en particulier l'océan, est le développement de mouvements à une échelle plus petite que la résolution numérique accessible. Ces mouvements transportent les quantités dynamiques de façon complexe, se traduisant par des effets de diffusion turbulente pour les grandeurs moyennées à l'échelle de la grille numérique. La paramétrisation de ces effets est un des problèmes essentiels en modélisation océanique pour réduire la taille de la grille nécessaire pour la résolution (i.e on diminue le nombre de variables du problème).

#### 4.4 Chimie moléculaire

**Mots clés :** santé, simulation biologique, dynamique, couplage, équation intégrale, parallélisme, dynamique moléculaire, méthode du continuum.

**Résumé :** *Nous nous intéressons aux simulations de gros systèmes moléculaires en biologie. Trois axes sont privilégiés : la méthode du continuum pour prendre en compte les effets du solvant autour d'une protéine, les algorithmes en dynamique moléculaire, ainsi que les algorithmes de couplages pour les méthodes hybrides (mécanique quantique, dynamique moléculaire et continuum).*

Les problèmes qui nous intéressent sont issus des gros systèmes moléculaires (>50 000 atomes) en biologie comme l'étude des protéines, des membranes, ... dans des solvants ioniques ou non. Ces problèmes sont importants notamment dans le domaine de la santé pour la construction de nouveaux médicaments, pour comprendre des réactions des mécanismes chimiques, ... Un autre problème concerne la détermination par des méthodes de dynamique moléculaire de la structure tri-dimensionnelle d'une protéine (folding).

Les problèmes mathématiques issus de ces applications et que nous abordons dans le projet concernent d'une part la justification des algorithmes déjà utilisés et d'autre part le développement de nouveaux algorithmes pour un grand nombre d'atomes, des schémas d'intégration pour des temps longs et la prise en compte des différentes échelles de temps. Le parallélisme est un des outils principaux pour nous permettre d'obtenir des méthodes efficaces.

## 5 Logiciels

### 5.1 Bibliothèque Para++

**Participant :** Olivier Coulaud [correspondant].

**Mots clés :** interface C++, échange de messages.

**Résumé :** *Para++ est une bibliothèque C++ dont l'objectif est de faciliter l'accès aux bibliothèques traditionnelles de communication par passage de messages.*

*Para++ apporte essentiellement deux simplifications : une structuration des tâches et une simplification dans l'utilisation de PVM et de MPI.*

Para++ est une bibliothèque C++ dont l'objectif est de faciliter l'accès aux bibliothèques traditionnelles de communication par passage de messages. Para++ apporte essentiellement deux simplifications :

- une simplification sur la structure même de l'application parallèle, grâce à l'introduction d'une hiérarchie dans les tâches la constituant. Para++ intègre notamment des possibilités de programmation M-SPMD (Multiple-SPMD, Single Program Multiple Data) ;
- une simplification dans l'utilisation des services de deux bibliothèques de communications : PVM et MPI. Grâce à l'introduction d'objets C++, l'utilisateur peut construire, envoyer et recevoir des messages de manière simplifiée.

La première diffusion de Para++ date de juin 1995. Cette version a été améliorée à plusieurs reprises, conduisant à la diffusion de la bibliothèque actuelle via la page web :

<http://www.loria.fr/para++/>.

La version 2.x tourne sur toute station de travail, PC sous Linux, Solaris ainsi que sur Paragon, SP2, PowerChallenge, Origin2000. Parmi les sites qui ont téléchargé le package, on retrouve notamment beaucoup d'universités (allemandes, américaines et françaises, mais également australiennes, africaines, japonaises, etc.), quelques organismes gouvernementaux, ainsi que quelques organismes commerciaux. Une liste de diffusion a été créée pour faire le lien avec les utilisateurs (para++@loria.fr).

## 5.2 SLV

**Participants :** Olivier Coulaud, Jean-Rodolphe Roche, Eric Sonnendrücker.

SLV : logiciel de résolution de l'équation de Vlasov (1D,2D,3D) sur un maillage de l'espace des phases par une méthode semi-Lagrangienne. Le logiciel peut être utilisé pour des problèmes de plasmas ainsi que pour des problèmes de faisceaux de particules. Il est utilisé actuellement par des physiciens au LPMI à Nancy, au Lawrence Berkeley National Laboratory (Berkeley, Etats-Unis) et au GSI (Darmstadt, Allemagne).

## 6 Résultats nouveaux

### 6.1 Problèmes Non Linéaires en électromagnétisme

#### 6.1.1 Analyse mathématique et méthode numérique pour l'équation de Vlasov

**Participants :** Pierre Bertrand, Olivier Coulaud, Francis Filbet, Alain Ghizzo, Jean-Rodolphe Roche, Eric Sonnendrücker, Laurence Viry.

La méthode numérique la plus utilisée pour la résolution numérique de l'équation de Vlasov est une méthode particulière. Celle-ci a l'avantage de donner une description convenable de l'évolution de la distribution de particules pour un coût relativement faible. Par contre sa

convergence est lente (d'ordre  $1/\sqrt{N}$ ). Lorsqu'il est nécessaire d'avoir des résultats plus précis, il semble préférable d'utiliser une méthode d'ordre élevé sur un maillage de l'espace des phases, ce qui devient maintenant faisable grâce à l'augmentation de la puissance des ordinateurs.

**Approche Semi-Lagrangienne.** Comme alternative aux méthodes particulières qui ont l'inconvénient d'engendrer un fort bruit numérique, nous avons développé une méthode semi-Lagrangienne pour la résolution numérique de l'équation de Vlasov qui consiste à évaluer la fonction de distribution aux points d'un maillage dans l'espace des phases [4]. Pour que ces méthodes puissent être utilisées en deux dimensions (en réalité la fonction de densité est une fonction à quatre dimensions : deux d'espace et deux de phase) ou plus, une parallélisation efficace est indispensable. Dans ce cadre nous avons développé des codes de Vlasov (VSL) parallèles en dimension 2, 4 et 6 à l'aide des directives OpenMP. La bibliothèque complète est terminée aussi bien pour les versions OpenMP que MPI. Nous avons développé des transpositions de matrice à base d'algorithme de type hypercube pour des décompositions de données non classiques issues des fonctions de densité qui sont des fonctions à 4 et 6 variables.

**Méthodes de volumes finis** Pour la résolution numérique du système de Vlasov-Poisson, nous avons prouvé la convergence d'un schéma d'ordre 1 [15] et obtenu des estimations d'erreur dans un cas particulier (donnée initiale à support compact). Nous avons aussi étudié différents types d'interpolations et de reconstructions des flux pour minimiser les effets dissipatifs du schéma [28].

Pour finir, le développement d'une méthode pour le cas axi-symétrique est réalisé. Les premiers résultats sont très encourageants et vont permettre d'utiliser ces méthodes dans les applications concrètes liées à la physique des faisceaux.

**Méthode de correction hyperbolique pour les équations de Maxwell** Nous disposons maintenant, suite au travail de thèse de L. Viry [5] d'un code PIC en C++ flexible permettant d'incorporer et de tester diverses méthodes numériques ainsi que de traiter une large palette de problèmes physiques liés au plasmas. Nous avons pu comparer grâce à ce code différentes méthodes numériques permettant d'imposer que les conditions sur la divergence restent satisfaites lors de la simulation numérique des équations de Maxwell en temps long [23].

**Simulation numérique de faisceaux de particules** Nous avons implanté une méthode semi-Lagrangienne pour la résolution de Vlasov en 2D (4D dans l'espace des phases) dans le code WARP. Cette méthode a pu être comparée aux méthodes PIC utilisées traditionnellement dans ce genre de problèmes. Le code a également été appliqué pour la simulation de certains problèmes liés aux accélérateurs d'ions lourds comme l'évolution d'un faisceau initialement semi-Gaussien et la formation de halo [29].

## 6.2 Contrôle et identification de formes

### 6.2.1 Aspects théoriques généraux.

**Participants :** Gilles Fremiot, Jan Sokolowski.

La forme des ensembles tangents [14] ainsi que des propriétés de projection métrique sur des convexes du type obstacle dans des espaces de Banach sont obtenues dans [32].

Des résultats de sensibilité de la solution par rapport aux données sont obtenus pour le cas d'un contact dynamique sans frottement dans un travail en préparation par Jiri Jarusek, Murali Rao et Jan Sokolowski.

Dans l'article [9] préparé dans le cadre du projet POLONIUM nous étudions la stabilité des solutions du problème de l'élasticité quand le domaine sur lequel il est posé est appelé à varier. Nous envisageons des conditions au bord de type Dirichlet ou Neumann, ainsi que des variations non régulières. Nous mettons en particulier en évidence le fait que la  $\gamma$ -convergence pour le problème de Dirichlet entraîne la continuité pour le problème de l'élasticité. Nous étudions aussi le problème de la minimisation de la première valeur propre de l'opérateur de l'élasticité et nous prouvons l'existence d'un minimum sous contrainte de volume.

**Dérivation Topologique.** La dérivée topologique permet de localiser le lieu géométrique de la structure élastique où peut apparaître un trou. Un article sur le sujet pour des systèmes d'équations est préparé en collaboration avec S.A. Nazarov. Des applications sont données pour des équations elliptiques et un système d'élasticité en dimension trois.

On considère aussi un problème inverse [31] avec une méthode numérique basée sur la dérivation topologique. C'est l'un des sujets de recherche dans le cadre du projet POLONIUM.

**Dérivation par rapport au domaine.** L'étude de différents problèmes dans des domaines fissurés est très importante puisqu'elle conduit à plusieurs applications possibles parmi lesquelles l'identification et l'évolution de fissures au moyen de méthodes d'optimisation de formes. De plus, l'obtention de conditions nécessaires d'optimalité ainsi que la mise en œuvre de méthodes constructives de calcul d'un domaine optimal nécessitent bien souvent la détermination de la semi-dérivée eulérienne des fonctionnelles de coût associées au problème. C'est pourquoi il est primordial de dégager la structure de la semi-dérivée eulérienne.

Dans le cas de domaines réguliers, cette structure est bien connue. En effet, la semi-dérivée eulérienne dépend uniquement des perturbations de la frontière du domaine en direction de la normale. Ce résultat est encore valable pour des domaines réguliers par morceaux, pourvu que les singularités ne soient pas trop fortes. Par contre, ce n'est plus du tout vrai dans le cas de domaines fissurés.

Nous montrons, au cours de ce travail effectué dans le cas bidimensionnel [2], qu'il est possible de déterminer précisément la structure de la semi-dérivée eulérienne dans le cas d'un domaine possédant une fissure [18]. Nous constatons en outre que la semi-dérivée eulérienne ne dépend pas uniquement des perturbations de la frontière du domaine en direction de la normale, mais également des perturbations des extrémités de la fissure en direction tangentielle. Par rapport au cas régulier, nous voyons donc apparaître, en plus du terme classique, deux nouvelles contributions dues aux extrémités de la fissure. Cette structure obtenue sous forme

abstraite, c'est-à-dire avec la simple hypothèse de différentiabilité par rapport au domaine de la fonctionnelle, confirme les résultats donnés déjà pour une large classe de fonctionnelles intégrales.

Un autre sujet de recherche étudie un problème associé à la fonctionnelle d'énergie dans le cas d'une équation elliptique, puis deux problèmes non linéaires, dont l'un avec conditions de type Signorini, et enfin un problème de contrôle optimal. Dans chacun de ces cas, nous montrons que la fonctionnelle considérée est différentiable par rapport au domaine, afin d'appliquer le théorème de structure. Nous établissons pour ces exemples le lien avec les coefficients de singularités des solutions, ce qui conduit à la formule de Griffith. Les résultats présentés dans ce paragraphe sont obtenus dans [17], [16] et [19].

On donne également une autre application très importante du théorème de structure : l'étude de la différentiabilité par rapport au domaine des valeurs propres du laplacien avec condition de Neumann sur la fissure et condition de Dirichlet sur la frontière extérieure, ces valeurs propres étant comptées avec multiplicité. Afin de caractériser ces valeurs propres, nous utilisons le principe d'Auchmuty qui est dual du fameux principe de Rayleigh. On obtient la différentiabilité de la première valeur propre sans aucune hypothèse. Par contre, la différentiabilité des autres valeurs propres, qui s'expriment quant à elles au moyen d'un max-min, nécessite une hypothèse relativement forte sur les sous-espaces propres.

### 6.2.2 Problèmes à frontière libre.

**Participants :** Jean-Rodolphe Roche, Jan Sokolowski.

On étudie la modélisation, l'identification et le contrôle en mécanique des solides pour des problèmes de contacts pour des coques, des plaques, des problèmes en plasticité ainsi que l'identification des fissures pour des plaques élastiques.

Nous nous intéressons dans [30] à un problème d'optimisation de forme relatif à la modélisation d'endurcissement par induction. Le modèle mathématique consiste en une formulation potentielle vectorielle pour les équations de Maxwell couplée au bilan d'énergie et à une EDO. En agissant sur la forme de l'anneau, nous contrôlons la fraction de volume de la phase à haute température. L'anneau est modélisé par un tube et est défini par une courbe de vitesse unité. Le problème d'optimisation de forme est formulé pour l'ensemble des courbes admissibles. Nous prouvons l'existence d'un contrôle optimal. On utilise la méthode de la dérivée matérielle afin d'obtenir le gradient de forme de la fonctionnelle de coût. Enfin, on établit, dans le cas d'un tube optimal, les conditions nécessaires d'optimalité du premier ordre.

Nous travaillons sur l'étude et sur la résolution numérique d'un ensemble d'équations d'évolution non linéaires modélisant la solidification d'un alliage à deux composantes en intégrant une équation de température, une équation décrivant la concentration des deux composantes de l'alliage et une équation de changement de phase. On prête particulièrement attention à l'adaptation des maillages autour du front de solidification.

### 6.2.3 Identification d'inclusions et de fissures

**Participants :** Gilles Fremiot, Jan Sokolowski.

L'étude d'un modèle quasi-statique de membrane, dont les mouvements lents sont contrôlés par les déplacements d'un fil métallique à mémoire de forme se ramène à l'étude d'un problème aux frontières elliptique dans un domaine  $\Omega \subset \mathbf{R}^2$  possédant une fissure, couplé avec une équation non linéaire du quatrième ordre décrivant les déplacements verticaux sur la fissure. On prouve l'existence locale et l'unicité de solutions faibles. On obtient des estimations *a priori* uniformes afin de prolonger les solutions locales en solutions globales.

Pour un corps visco-élastique anisotrope en 2-d, on montre qu'à la singularité habituelle en racine carrée des contraintes à l'extrémité d'une fissure s'ajoute un terme qui dépend analytiquement de  $\log(r)$ , croît plus vite que  $|\log(r)|^N$  pour tout  $N$ , mais moins vite que  $r^{-a}$  pour tout  $a > 0$ . Par la même occasion, nous avons déterminé les conditions d'apparition de ces termes logarithmiques. En particulier, ils apparaissent dans le cas où les propriétés élastiques instantanées sont isotropes mais le noyau de la relaxation devient anisotrope et inhomogène.

Actuellement, nous commençons l'étude de la dimension trois. En particulier, nous considérons des inclusions avec des angles ; les solutions de l'équation d'état possèdent alors une partie singulière. On cherche un modèle mixte pour des méthodes numériques. C'est un travail avec A.M. Khludnev (Novosibirsk). La formule de Griffith est aussi obtenue dans le cas tridimensionnel [22]. Dans ce cas, la fissure bidimensionnelle est incluse dans un domaine tridimensionnel [21], [22].

### 6.2.4 Calcul numérique de formes

**Participants :** Jean-Rodolphe Roche.

**Application au magnétoformage** La résolution de problèmes d'optimisation de formes avec un nombre important de paramètres de contrôle est possible à condition d'utiliser tout l'arsenal de techniques adaptatives de l'optimisation et de la résolution d'équations aux dérivées partielles. Plusieurs aspects de ces techniques [25] ont été étudiés cette année. Nous savons que la convergence de méthodes d'optimisation de type "Newton-like", théoriquement superlinéaire, dépend en fait totalement de la précision avec laquelle on résout l'équation d'état. On a étudié la propagation des erreurs dans ces algorithmes dans le cas de l'optimisation de formes afin d'établir des critères d'adaptation des maillages. Un deuxième aspect étudié a été la résolution d'équations intégrales par des méthodes de type "panel clustering" dans une application de formage électromagnétique.

Les résultats obtenus en collaboration avec M.-A. Muschietti sont de nature numérique et concernent des estimations d'erreur *a posteriori* dans le cas des équations intégrales résolues par une méthode de Galerkin sur une surface fermée plongée dans  $R^3$ .

Les résultats numériques en dimension deux ont été vérifiés dans un test concernant le formage magnétique de métaux liquides.

## 6.3 Stabilisation de structures flexibles

### 6.3.1 Stabilisation d'un système hybride

**Participants** : Francis Conrad, Geoff O'Dowd, Fatima Zahra Saouri.

Pour un modèle simplifié de pont roulant (câble flexible attaché à un chariot et transportant une masse) qu'on ne peut stabiliser uniformément par des feedbacks frontière classiques en vitesse et position, la stabilisation uniforme avec des feedbacks d'ordre plus élevé (prenant en compte la vitesse de rotation) avait été obtenue [11]. Dans le cas où on ne prend pas en compte la position dans le terme de commande, le système admet les constantes comme solutions, voire les fonctions affines en temps. L'analyse asymptotique en temps de ce problème non coercif a été faite dans le cas d'un feedback uniquement en vitesse, linéaire ou non linéaire. C'est l'objet de la deuxième partie de la thèse de F. Saouri [3]. L'extension à des modèles où le câble est remplacé par une poutre est en cours, ainsi que le cas d'un feedback dissipatif mais non monotone, suite au travail amorcé par Geoff O'Dowd dans sa thèse..

### 6.3.2 Analyse spectrale

**Participants** : Francis Conrad, Fatima Zahra Saouri.

Pour une poutre avec masse à un bout et contrôle force frontière, l'obtention du taux optimal de décroissance de l'énergie avait été établie dans certains cas particuliers de feedbacks d'ordre élevé, où on peut se ramener à un problème de poutre sans masse, avec commande en vitesse, pour lequel on sait démontrer l'existence d'une base de Riesz par analyse asymptotique du spectre du système et utilisation de résultats de perturbation. Cette méthode semble opérante en général pour des contrôles frontière. Nous avons utilisé la théorie de Shkalikov qui donne un cadre général pour vérifier qu'un système de vecteurs propres généralisés de l'opérateur forme une base de Riesz de l'espace d'énergie, technique particulièrement adaptée aux systèmes où la valeur propre apparaît dans les conditions au bord, ce qui est le cas avec des contrôles frontière dynamiques. Ont été traités le cas d'une poutre, avec ou sans masse à un bout, et un contrôle moment. La technique est également adaptable au cas d'une poutre avec moment d'inertie et contrôle force (travail en cours).

### 6.3.3 Contrôlabilité exacte et applications

**Participants** : Francis Conrad, Marius Tucsnak.

La contrôlabilité exacte (qui est un concept plutôt théorique) permet, si elle est établie, de nombreuses applications : stabilisation par feedback direct, stabilisation par bouclage via une équation de Riccati, contrôle  $H^\infty$ . Dans une série de travaux (avec George Weiss (Imperial College et Kaïs Ammari (IECN)) on donne des cadres précis où contrôlabilité implique stabilisabilité [6]. Ces résultats étendent un résultat de A. Haraux, valable uniquement pour des contrôles bornés. Les résultats généraux sont ensuite appliqués à des modèles de poutres et de plaques élastiques [6]. Dans le cas d'un feedback ponctuel, on établit des estimations valables même lorsque les solutions n'ont pas une énergie décroissante exponentiellement [6].

Par ailleurs, on considère le problème de la contrôlabilité simultanée d'une structure flexible et d'un système de dimension finie. Le résultat principal (avec G. Weiss) énonce que les deux systèmes sont simultanément contrôlables si les deux spectres sont disjoints [26]. Une attention particulière a été accordée aux développements des méthodes de calcul permettant une implémentation effective des contrôles. Pour des raisons de robustesse, on est intéressé par des contrôles en boucle fermée.

Dans de nombreux problèmes l'utilisation de capteurs et d'actionneurs co-localisés permet de donner des lois de feedback très simples. Il n'est pas immédiat d'établir l'efficacité de ce type de méthodes par une analyse théorique car les constantes intervenant dans les estimations sont souvent difficiles à estimer. C'est pour cette raison que nous avons utilisé la simulation numérique pour estimer les taux de décroissance et éventuellement trouver le positionnement optimal des actionneurs. Les premiers résultats numériques sont déjà disponibles et ils ont été obtenus dans le cadre de la thèse d'Antoine Chapelon.

Nous nous sommes aussi intéressé au problème de positionnement optimal des capteurs et des actionneurs pour le contrôle des structure élastiques. Les premiers résultats dans cette direction sont annoncés dans [7].

En ce qui concerne le calcul effectif des contrôles exacts, on étudie le développement d'une méthode nécessitant la résolution d'une équation de Riccati d'évolution. Cette approche est nouvelle, même pour les systèmes d'équations différentielles ordinaires, cas où on a obtenu les premiers résultats numériques.

L'implémentation de ce type de méthode pour des problèmes concrets provenant de l'hydraulique (en collaboration avec CEMAGREF Montpellier et le projet CONGE) est en cours.

### 6.3.4 Analyse et contrôle des interactions fluide-structure

**Participants :** Antoine Chapelon, Marius Tucsnak.

Savoir comment agir sur un écoulement fluide est un problème d'intérêt primordial dans de nombreux domaines d'applications : aéronautique, questions de pollutions et d'environnement, régularisation de mouvements fluides et de vibrations dans des réservoirs ou des tuyaux, etc. Pour ce type de problèmes la réduction à un modèle de dimension finie est loin d'être immédiate.

Le plus souvent le fluide entoure ou est contenu dans une structure élastique qui interagit avec lui. Il convient alors d'étudier des systèmes fluide-structure. Ce sujet est en pleine effervescence actuellement. Dans ce type de problème, un système d'EDP modélisant le fluide à l'intérieur d'une cavité (Laplace, ondes, Stokes ou Navier-Stokes) est couplé avec les équations modélisant le mouvement d'une partie du bord (corps rigide ou élastique). Les difficultés d'une telle étude sont nombreuses, car il s'agit de problèmes de type frontière libre. Nous avons pour l'instant étudié l'existence des solutions dans le cas du mouvement d'un corps rigide à l'intérieur d'un fluide visqueux [10]. Les travaux en cours portent sur la convergence des méthodes numériques de type ALE, en vue de leurs applications aux problèmes de contrôle.

## 6.4 Prédicibilité et simulation

**Mots clés :** Prédicibilité, attracteur, climat, sensibilité, modèle de l'océan, orbites

périodiques..

**Résumé :** *Le problème général de l'étude du climat du modèle consiste en l'étude - théorique et numérique - de l'attracteur du système et de ses particularités telles que processus de bifurcations, points stationnaires et orbites périodiques.*

#### 6.4.1 Nombre fini de degrés de liberté déterminants pour un modèle quasigéostrophique multicouches de l'océan.

**Participant :** Christine Kazantsev.

Dans [8] on considère un modèle quasigéostrophique multicouche de l'océan et on démontre que le comportement asymptotique de ses solutions peut être décrit par un nombre fini de paramètres déterminants. Sous certaines conditions supplémentaires, on montre également que la dynamique de la couche de fond est complètement déterminée par des paramètres connectés seulement aux couches supérieures. Ceci veut dire que l'information sur la couche de fond n'est pas essentielle pour décrire le comportement asymptotique du système que l'on considère.

#### 6.4.2 Autour du modèle barotrope de l'océan.

**Participants :** Christine Kazantsev, Evgueni Kazantsev.

**Étude la structure de l'attracteur.** Le théorème d'existence de l'attracteur de l'approximation dimension finie du modèle est prouvé ainsi que la convergence de l'attracteur du modèle discretisé vers l'attracteur du modèle originale. Quelques propriétés des solutions stationnaires du modèle sont examinées [13].

La structure de l'attracteur est expliquée en partie par la séquence de bifurcations à laquelle le système est soumis par les variations des paramètres principaux. La particularité du système est l'existence de deux bassins "presque invariants" de l'attracteur chaotique avec des transitions très rares entre eux. Ceci est lié à l'apparence du couple de solutions stationnaires non symétriques dans le modèle avec un forçage symétrique. [13].

Les maxima dans le spectre de l'énergie ont été étudiés aussi. Ces maxima correspondent à la fréquence principale de la solution périodique apparue dans la bifurcation de Hopf, ou aux fréquences du phénomène de Feigenbaum.

**Sensibilité de l'attracteur du modèle barotrope de l'océan aux perturbations extérieures: approche par les orbites périodiques** La méthode numérique d'estimation *a priori* de la sensibilité de l'attracteur est appliquée au modèle barotrope de l'océan. L'étude de cette méthode montre une bonne précision d'approximation de la sensibilité. Juste une vingtaine d'orbites est suffisante pour approximer l'attracteur du modèle barotrope [33].

### 6.4.3 Sensibilité de l'attracteur de Lorenz. Une approche par les orbites périodiques instables

**Participant :** Evgueni Kazantsev.

La description de l'attracteur d'un système chaotique par les orbites périodiques instables a été utilisée pour le développement d'une méthode d'estimation *a priori* de la sensibilité des moments statistiques de la solution du système sur l'attracteur. Cette méthode utilise l'approche linéaire. Elle permet de déterminer la perturbation du forçage extérieur qui maximise la norme de la perturbation d'un moment statistique.

Cette méthode a été appliquée au modèle de Lorenz. Les estimations ont été comparées avec les perturbations des moments statistiques calculées directement par l'intégration du modèle. La comparaison montre qu'il suffit d'avoir une centaine d'orbites périodiques pour calculer les estimations *a priori*; et que l'approche linéaire reste valable jusqu'à des perturbations du forçage de grande norme [20].

### 6.4.4 Schémas compacts pour les modèles océaniques

**Participant :** Christine Kazantsev.

On examine l'intérêt des schémas compacts aux différences dans le cadre de la modélisation océanique. Les propriétés des différentes familles de schémas compacts sont étudiées et comparées au schéma classique centré d'ordre deux. On regarde à la fois l'aspect théorique et numérique, pour différents types de processus océanique : ondes d'inertie-gravité, ondes de Rossby, Problème aux limites de Munk et de Stommel, modèle d'eau peu profonde ("shallow-water"). Il semble que l'augmentation de l'ordre de précision n'améliore pas toujours les résultats. Cependant, certains schémas compacts d'ordre 4 semblent donner un bon compromis, i.e. améliorent sensiblement la solution pour un surcoût très raisonnable. Ce travail est effectué en collaboration avec E. Blayo (LMC, Projet IDOPT) et M. Tolstykh (INM).

## 6.5 Chimie moléculaire.

**Participants :** Olivier Coulaud, Gérald Monard, Károly Németh, Bruno Pinçon, Stéphane Rochaud.

**Résumé :** *Les recherches concernent ici le domaine de la chimie moléculaire et plus particulièrement la simulation pour des systèmes biologiques. Trois axes sont développés, à savoir :*

- le calcul du potentiel électrostatique autour d'une molécule plongée dans un solvant,*
- le développement d'algorithmes parallèles efficaces pour la dynamique moléculaire.*
- le couplage de méthodes pour construire une méthode hybride MQ/DM/CM permettant le suivi de réaction chimique dans de gros systèmes*

*Ces différents projets sont aussi développés en collaboration avec le LCTN et au travers de l'action coopérative SIMBIO.*

### 6.5.1 Potentiel électrostatique

Nous nous intéressons au calcul du champ électrostatique autour d'une molécule lorsqu'elle est plongée dans un solvant non ionique. Le problème est écrit sous la forme d'une équation intégrale et est résolu par une méthode de collocation. D'une part l'accent a été mis d'une part sur la génération de «bons» maillages pour de grosses molécules. D'autre part, nous avons développé une version MPI du code.

**Maillage :** Le calcul du potentiel par une méthode intégrale nécessite d'avoir un “bon maillage” de la surface moléculaire. Cette surface est analytique par morceaux et est constituée de morceaux de sphères et de tores. De manière générale, les maillages issus des logiciels de chimie comme le programme MSMS<sup>7</sup>, génère une triangulation conforme au sens des connectivités, mais qui peut être assez mauvaise au voisinage d'une singularité initiale (pics, triangles quasi retournés). La triangulation issue de ces codes est utilisée pour visualiser la surface moléculaire mais pas pour calculer des grandeurs sur celle-ci, aussi ces problèmes sont peu importants. Nous avons développé un programme qui, partant d'une triangulation obtenue avec MSMS, permet de supprimer les problèmes dus aux singularités et de raffiner ou de déraffiner selon une carte de tailles issue de critères géométriques et du critère d'interpolation du second membre de la solution. Les maillages ainsi obtenus permettent de diminuer fortement le nombre de points de collocation pour la même précision.

### 6.5.2 Dynamique moléculaire

Dans le cadre de l'action incitative, nous avons entrepris d'améliorer le code Takakaw développé au sein du projet Apache au dessus d'Athapascan. Le code parallèle repose sur une décomposition spatiale de l'espace en boîtes, avec plusieurs stratégies d'équilibrage de charge. D'autres fonctionnalités ont été introduites dans le code à savoir l'anti-rotation du centre de masse et une dynamique sous contraintes, algorithme Shake, pour supprimer les hautes fréquences entre les atomes d'hydrogène et les atomes lourds. Les algorithmes standards pour résoudre l'ensemble des contraintes non linéaires ont été implantés (Newton Gauss-Seidel et Newton SOR). De plus, nous avons développé un algorithme de type Newton par bloc qui permet de traiter les contraintes par bloc de contraintes indépendantes. Un bloc correspond à toutes les liaisons entre un atome lourd donné et les atomes d'hydrogène reliés à cet atome. La taille des blocs ainsi construits pour les problèmes de biologie est au plus 3x3. Cette approche permet de gagner un facteur 2 sur la résolution des contraintes pour une saturation de  $10^{-12}$ . [12].

---

7. [http://www.scripps.edu/pub/olson-web/people/sanner/html/msms\\_home.html](http://www.scripps.edu/pub/olson-web/people/sanner/html/msms_home.html)

### 6.5.3 Couplage de méthodes

L'objectif est de fournir à l'utilisateur chimiste une méthode efficace de couplage mécanique quantique, dynamique moléculaire et méthode du continuum ainsi qu'un environnement de simulation distribué. Nous nous concentrons pour l'instant sur le couplage entre la dynamique moléculaire et la méthode du continuum pour calculer le potentiel électrostatique.

Pour construire un schéma de couplage conservatif, on introduit un hamiltonien en ajoutant à celui de la dynamique moléculaire deux termes. Le premier correspond à la quantité de mouvement de la surface discrète ; le deuxième est un terme d'interaction entre les atomes et le continuum, il comprend le potentiel de polarisation et un potentiel de répulsion de la surface. A l'aide de cet hamiltonien, on construit un schéma symplectique pour le système complet (atomes et triangulation de la surface). De plus en introduisant une contrainte sur le volume, on obtient un algorithme de type NVE. Ces deux algorithmes sont en cours de validation.

Pour coupler le code de dynamique moléculaire TAKAKAW et le code électrostatique nous utilisons le bus logiciel CORBA [27]. Ce bus à objets repartis fonctionne selon un modèle objet Client/Serveur et assure la transparence des communications entre applications hétérogènes (différents langages de programmation, modèle de parallélisme). De plus pour le suivi de la simulation nous avons développé en Java un client qui permet de visualiser un certain nombre de grandeurs comme la température, l'énergie, le temps moyen d'une itération, la charge des processeurs ...

### 6.5.4 Méthode rapide pour l'optimisation de géométrie moléculaire

Nous avons développé un nouvel algorithme efficace pour l'optimisation de géométrie moléculaire en coordonnées internes. L'optimisation en coordonnées internes converge plus rapidement que l'optimisation en coordonnées cartésiennes. Toutefois de nombreux changements de coordonnées sont nécessaires au cours de l'algorithme. Le temps de calcul des algorithmes classiquement utilisés pour ces transformations est proportionnel à  $N^3$  ( $N$  le nombre d'atomes) et limite la taille des systèmes à optimiser. La méthode que nous proposons dans [24] donne un temps de calcul proportionnel au nombre d'atomes.

## 7 Contrats industriels (nationaux, européens et internationaux)

### 7.1 CEA

**Participant** : Eric Sonnendrücker.

Contrat avec le CEA Bruyères-Le-Chatel pour le développement d'une méthode de décomposition de domaines pour la parallélisation d'un code tridimensionnel pour la résolution des équations de Maxwell sous forme d'équations des ondes avec contraintes.

## 8 Actions régionales, nationales et internationales

### 8.1 Actions régionales

#### 8.1.1 Centre Charles Hermite

O. Coulaud : directeur adjoint du Centre, membre du conseil des opérations et du comité des bourses, et responsable de l'opération simulation moléculaire complexe.

#### 8.1.2 Autres

Participation à la Semaine de la Science le 21 octobre 2000. Evgueni Kazantsev Marius Tucsnak.

### 8.2 Actions nationales

#### 8.2.1 Action de Recherche Coopérative COUPLAGE

**Participant** : Olivier Coulaud.

*Les partenaires sont les projets APACHE (UR Rhône-Alpes), PARIS (UR Rennes), SINUS (UR Sophia Antipolis) ainsi que les industriels Aerospatiale Matra, Dassault-Aviation et Simulog.* L'objectif de l'action proposée est d'étudier le problème du couplage de codes de simulation à la fois sous l'angle des mathématiques appliquées et de l'informatique. Cette action sera également l'occasion d'expérimenter le concept d'objet CORBA parallèle, développé par les chercheurs du projet PARIS, au sein d'une plate-forme existante (CAST), réalisée par le projet SINUS, afin de permettre le couplage de codes de simulation. Cette expérimentation sera effectuée à l'aide de plusieurs démonstrateurs dans des domaines très variés : optimisation de formes en aérodynamique (projet SINUS), couplage fluide/structure (projet SINUS), couplage en biologie moléculaire (projet APACHE et NUMATH).

L'avancement des travaux se trouvent sur la page web  
<http://www.inrialpes.fr/sinus/couplage>.

#### 8.2.2 Participations à des GDR

Optimisation et contrôle actif de formes (G. Frémiot, J.R. Roche, J. Sokolowski),  
 Simulation de particules chargées (O. Coulaud, F. Filbet, J.R. Roche, E. Sonnendrücker).  
 Automatique, groupe thématique "contrôle des fluides" (M. Tucsnak),

#### 8.2.3 Responsabilités nationales et locales assurées par les membres du projet :

**A l'Inria** : participation au comité des Projets de l'Inria-Lorraine (O. Coulaud).

**Dans les instances universitaires et Cnrs** : Comité de programme de l'IDRIS (O. Coulaud) ; Responsable du DEA de mathématiques de l'UHP (F. Conrad), Commission de spécialistes 25 ème et 26 ème sections de l'Université Henri Poincaré Nancy I et Nancy II (F. Conrad, J. Sokolowski, B. Pinçon, J. R. Roche) ; Commission de spécialistes de l'université de Metz (Ch. Kazantsev, F. Conrad) ; Commission de spécialistes de l'INPL (F.

Conrad et B. Pinçon); Commission de spécialistes de l'université de Strasbourg (Ch. Kazantsev, M. Tucsnak).

### 8.3 Actions européennes

#### 8.3.1 Projets PROCOPE

Le thème du premier projet concerne l'étude du déplacement de particules chargées. Les partenaires nationaux sont le CEA Bruyères-Le-Chatel et le Centre de mathématiques appliquées de l'Ecole Polytechnique. Les partenaires Allemands sont le Forschungszentrum de Karlsruhe et l'Université de Stuttgart.

Le thème du second projet concerne l'étude des équations non linéaires. Le partenaire en Allemagne est le WAIS à Berlin.

#### 8.3.2 Projet Polonium

**Participants :** Gilles Frémiot, Jean-Rodolphe Roche, Jan Sokolowski.

Le thème du projet concerne des problèmes d'optimisation de formes dans les matériaux. Les partenaires sont le Laboratoire de mathématiques de l'université de Besançon, les laboratoires d'informatique des systèmes et de mécanique (Pologne). Cette année les échanges suivants ont eu lieu : A. Zochowski (Varsovie), T. Lodygowski (Poznan), D. Bucur (Besançon) et J. Sokolowski (Nancy).

### 8.4 Relations internationales

#### 8.4.1 Lawrence Berkeley National Laboratory

Collaboration avec le Lawrence Berkeley National Laboratory (Accelerator and Fusion Research Department) sur l'étude numérique et le développement de logiciels pour l'étude de la faisabilité de la fusion inertielle par ions lourds (E. Sonnendrücker).

#### 8.4.2 Projets Lyapounov

- "Variability and predictability of the oceanic and atmospheric circulation" de l'Institut Franco-Russe A.M. Lyapunov. (Responsables : C. Kazantsev, V.P. Dymnikov).
- "Singularités au voisinage des extrémités et des fronts de fissures dans un corps anisotrope vieillissant". (Responsables : J. Sokolowski, A. Kondratiev).

### 8.5 Visites et invitations de chercheurs

Invitation dans le projet de M. Rao (University of Florida), S.A. Nazarov (St.Petersburg), T. Lewinski (Varsovie), A. Zochowski (Varsovie), D. Hoernberg (WIAS, Berlin), W. Horn (Los Angeles), J. San Martin (Santiago), V. Starovoitov (Novosibirsk), G. Weiss (Londres).

## 9 Diffusion de résultats

### 9.1 Animation de la Communauté scientifique

F. Conrad et M. Tucsnak ont assuré la publication du volume [1] contenant les travaux de la conférence "Contrôle des systèmes gouvernés par des équations aux dérivées partielles" qui a eu lieu en 1999 à Nancy.

Les membres du projet ont participé à l'organisation du groupe de travail Besançon-Metz-Nancy-Strasbourg sur le contrôle de systèmes distribués et à l'organisation des Journées GDR Optimisation et contrôle actif de formes 13-14 avril 2000 (A. Henrot, J.R. Roche, J. Sokolowski)

Organisation du Workshop du GdR SPARCH sur les modèles gyrocinétiques à Nancy les 26 et 27 septembre 2000.

### 9.2 Participation à des colloques, séminaires, invitations

#### 9.2.1 Congrès internationaux

First SIAM Conference on Computational Science and Engineering, Washington, D.C., Septembre 21-24, 2000 (J. Sokolowski), MTNS 2000, 19 -23 Juin 2000 (J.R. Roche, Jan Sokolowski, M. Tucsnak) , ECCOMAS 2000, 11-14 Septembre 2000 (J. R. Roche), 10th International Congress of Quantum Chemistry, Menton, France, June 2000 (K. Nemeth), 3rd European Conference on Computational Chemistry, Budapest, Hungary, sept. 2000 (K. Nemeth), Heavy Ion Fusion 2000 International Symposium (E. Sonnendrücker), International Computational Accelerator Physics 2000 (E. Sonnendrücker, F. Filbet).

#### Conférence invitée

Optimal control of complex structures, Oberwolfach, 4-10 Juin, 2000 (J. Sokolowski, M. Tucsnak)

#### 9.2.2 Colloques et workshops

CANUM 2000 (F. Filbet, E. Kazhantzev, C. E. Kazhantzev, F. Saouri),  
iHPerf2000 (O. Coulaud),

#### 9.2.3 Invitation à des séminaires et cours

**séminaires** Université de Zurich (F. Conrad, M. Tucsnak), Université de Rome 2 (M. Tucsnak), Université de Besançon (F. Conrad), Université de Metz (M. Tucsnak), Université de Strasbourg (F. Filbet), Université de Floride (J. Sokolowski), Université de Ferrara - Italie (F. Filbet) Institut Européen de Chimie et Biologie (O. Coulaud)

**cours** Dans le cadre de la conférence internationale MTNS 2000 M. Tucsnak a présenté (avec O. Staffans et G. Weiss) un mini-cours intitulé : "Well-posed linear systems."

### 9.3 Enseignement

La majorité des membres du projet sont des enseignants-chercheurs et s'investissent donc largement dans des enseignements universitaires :

- licence de mathématiques : Analyse numérique (M. Tucsnak).
- maîtrise de mathématique : Analyse numérique et des éléments finis, (J. Sokolowski)
- Cours de D.E.A. : EDP (F. Conrad, M. Tucsnak)
- Cours de D.E.S.S. - I.M.O.I : éléments finis et EDP, (Ch. Kazantsev), différences finies et EDP, Volumes Finis (J.R. Roche), recherche opérationnelle (J Sokolowski), optimisation non linéaire (F. Conrad), calcul parallèle (O. Coulaud), Fortran (E. Kazantsev)
- Cours de D.E.S.S. - I.D.C : Option Mathématiques (J.R. Roche)
- Agrégation de Mathématiques, option Analyse Numérique, (J.R. Roche).

## 10 Bibliographie

### Livres et monographies

- [1] F. CONRAD, M. TUCSNAK (éditeurs), *Control of systems governed by partial differential equations*, Société de Mathématiques Appliquées et Industrielles, Paris, 2000, Papers from the conference held in Nancy, March 6–10, 1999.

### Thèses et habilitations à diriger des recherches

- [2] G. FREMIOT, *Structure de la semi-dérivée eulérienne dans le cas de domaines fissurés et quelques applications*, Thèse de l'Université Henri Poincaré Nancy 1, 2000.
- [3] F. SAOURI, *Stabilisation de quelques systèmes élastiques. Analyse spectrale et comportement asymptotique*, Thèse de l'Université Henri Poincaré, Nancy 1, IECN, 2000.
- [4] E. SONNENDRÜCKER, *Contributions à l'analyse mathématique et à la simulation numérique des plasmas et des faisceaux de particules chargées*, Habilitation à diriger les recherches, Université Henri Poincaré, Nancy 1, 2000.
- [5] L. VIRY, *Traitement de Couche Limite en Electromagnétisme et Méthode P.I.C : Algorithme et Approche Objet*, Thèse de l'Université Henri Poincaré, Nancy 1, IECN, 2000.

### Articles et chapitres de livre

- [6] K. AMMARI, M. TUCSNAK, « Pointwise feedback stabilization of Euler Bernoulli beam », *SIAM J. Control Optim.*, à paraître.
- [7] K. AMMARI, M. TUCSNAK, A. HENROT, « Optimal location of the actuator for the pointwise stabilization of a string », *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.* 330, 4, 2000, p. 275–280.

- 
- [8] C. BERNIER-KAZANTSEV, I. CHUESHOV, «The finiteness of determining degrees of freedom for the QG multilayer ocean model.», *Nonlinear analysis TMA* 42, 2000, p. 1499–1512.
- [9] D. BUCUR, A. HENROT, J. SOKOLOWSKI, A. ZOCHOWSKI, «Sur la continuité des solutions du système de l'élasticité vis à vis de variations du domaine», *Advances in Mathematical Sciences and Applications*, à paraître.
- [10] C. CONCA, J. SAN MARTÍN H., M. TUCSNAK, «Existence of solutions for the equations modelling the motion of a rigid body in a viscous fluid», *Comm. Partial Differential Equations* 25, 5-6, 2000, p. 1019–1042.
- [11] F. CONRAD, A. MIFDAL, «Uniform stabilization of a hybrid system with a class of nonlinear feedback laws», *Advances in Mathematical Sciences*, à paraître.
- [12] O. COULAUD, P.-E. BERNARD, «Parallel Constrained Molecular Dynamics», *Numerical Algorithms*, 24, 2000, p. 393–405.
- [13] V. DYMNIKOV, E. KAZANTSEV, C. KAZANTSEV, «On the genetic memory of the chaotic attractor of the barotropic ocean model.», *Chaos, Solitons and Fractals*. 11, 2000, p. 507–532.
- [14] E.BEDNARCZUK, M.PIERRE, E.ROUY, J.SOKOLOWSKI, «Tangent sets in some functional spaces», *Nonlinear Anal.* 42, 5, Ser. A: Theory Methods, 2000, p. 871–886.
- [15] F. FILBET, «Convergence d'un schéma de type Volumes finis pour Vlasov-Poisson 1D.», *C.R.A.S de Paris* 330, juillet 2000, p. 979–984.
- [16] G. FREMIOT, J. SOKOLOWSKI, «Hadamard formula in nonsmooth domains and applications», *Proceedings of 19th IFIP TC7 Conference on System Modelling and Optimization*, Kluwer, à paraître.
- [17] G. FREMIOT, J. SOKOLOWSKI, «Shape sensitivity analysis of problems with singularities», *Proceedings of Partial Differential Equations on Multistructures*, Marcel Dekker, à paraître.
- [18] G. FREMIOT, J. SOKOLOWSKI, «Structure de la dérivée eulérienne d'une fonctionnelle de forme différentiable dans le cas d'un ouvert fissuré», *Siberian Mathematical Journal*, à paraître.
- [19] G. FREMIOT, J. SOKOLOWSKI, «Shape sensitivity analysis of eigenvalues in domains with cracks», *Proceedings of the Sixth International Conference on Methods and Models in Automation and Robotics*, Miedzzydroje, Pologne, 2000.
- [20] E. KAZANTSEV, «Sensitivity of Attractor to external influences: Approach by Unstable Periodic Orbits», *Chaos, Solitons and Fractals.*, à paraître.
- [21] A. KHLUDNEV, K. OHTSUKA, J. SOKOLOWSKI, «On derivative of energy functional for elastic bodies with cracks and unilateral conditions», *Quarterly of Applied Mathematics*, à paraître.
- [22] A. KHLUDNEV, J. SOKOLOWSKI, «O proizvodnoi funktsionala energii po dline treshuny v zadachah teorii uprugosti (in Russian)», *Prikladnaya Mekhanika i Matematika*, 2000.
- [23] C.-D. MUNZ, P. OMNES, R. SCHNEIDER, E. SONNENDRÜCKER, U. VOSS, «Divergence correction techniques for Maxwell solvers based on a hyperbolic model», *J. Comput. Phys.* 161, 2, 2000, p. 484–511.

- [24] K. NÉMETH, O. COULAUD, G. MONARD, J. ÁNGYAN, «Linear scaling algorithm for the coordinate transformation problem of molecular geometry optimization», *Journal of Chemical Physics* 113, 2000, p. 5598–5603.
- [25] A. NOVRUZI, J. R. ROCHE, «Newton method in 3-d shape optimization problem», *BIT* 40, 1, 2000, p. 102–120.
- [26] M. TUCSNAK, G. WEISS, «Simultaneous exact controllability and some applications», *SIAM J. Control Optim.* 38, 5, 2000, p. 1408–1427.

### Communications à des congrès, colloques, etc.

- [27] O. COULAUD, T. GAUTIER, « Architecture distribuée pour la simulation moléculaire distribuée », in : *iHPerf2000: Applications Haute Performances Analyse Conception et Utilisation des grappes homogènes ou hétérogènes de calculateurs*, J.-L. Pazat, S. Rajopadhye, J. Roman (éditeurs), p. 221–226, 2000.
- [28] F. FILBET, E. KAZANTSEV, R. SONNENDRÜCKER, P. BERTRAND, « Comparison of eulerian Vlasov solvers », in : *Proceedings of the International Computational Accelerator Physics 2000 conference*, 2000.
- [29] E. SONNENDRÜCKER, J. J. BARNARD, A. FRIEMAN, D. P. GROTE, S. M. LUND, «Simulation of heavy ion beams with a semi-Lagrangian Vlasov solver », in : *Proceedings of the Heavy Ion Fusion 2000 International Symposium*, 2000.

### Rapports de recherche et publications internes

- [30] D. HOEMBERG, J. SOKOLOWSKI, «Optimal shape design of inductor coils for surface hardening», *rapport de recherche n° 19*, Institut Elie Cartan, 2000.
- [31] L. JACKOWSKA-STRUMILLO, J. SOKOLOWSKI, A. ZOCHOWSKI, A. HENROT, «The topological derivative method and artificial neural networks for numerical solution of shape inverse problems», *rapport de recherche n° 24*, Institut Elie Cartan, 2000.
- [32] M. RAO, J. SOKOLOWSKI, «Tangent sets in Banach spaces», *rapport de recherche*, 2000.

### Divers

- [33] E. KAZANTSEV, «Sensitivity of the attractor of the barotropic ocean model to external influences: Approach by Unstable Periodic Orbits.», soumis.